Quantum Field Theory of Crystals

長崎総合科学大学　北 村 豊 幸*

1. 序

今まで，結晶の物理は半現象論的にしか研究されてこなかった。即ち，イオンによる自己無撞着場の周期的ポテンシャルによって結晶は整列しているとして，その平衡点からのずれのみを量子化して，分子そのものの量子化はされてこなかった。最近，和達等[1]は汎関数形式によるボゾン変換法を用いて，徹底した場の量子論を結晶に適用した。彼等は，ラグランジュアンに空間並進不変と数密度演算子の基底状態での期待値の周期的存在を仮定してWard-高橋関係式を導き，それを手掛りとして，結晶や転位等の一般論を展開している。

われわれは，ボーズの分子によって構成されている系のラグランジュアンに空間並進不変と分子の場の演算子 $\phi(x)$ の基底状態での期待値の周期的存在を仮定し，Ward-高橋関係式を求め，これから，$\phi(x)$ の dynamical map の次のような性質を求めることが出来た[2]：位相因子を含めて，$\phi(x)$ の基底状態での期待値は格子ベクトルの周期関数である。フォノン場の一次のオーダーまででは，場 ϕ の dynamical map は ϕ の基底状態での期待値の空間微分のかかったフォノン場の三つの成分の適当な線型結合で表わされる。

一方，De Luca 等[3]は結晶のモデルを検討し，フォノン・モードのような gapless spectrum の存在を示した。彼等は，われわれが Ward-高橋関係式によって空間並進不変を正確に取扱ったようにはしなかった。彼等は準運動量 k の第一励起状態として，ϕ の基底状態の期待値を e^{ikx} で変調したものをとった。Ward-高橋関係式は，むしろ，準運動量 k の第一励起状態として，ϕ の基底状態での期待値の空間微分を e^{ikx} で変調したものをとるべきことを示している。

そこで，この論文の目的は，空間並進不変を正確に考慮して，間隙のないフォノン・スペクトルを検討することである。原理的には，Ward-高橋関係式が成立するように高次の励起状態をとり入れることによって，いくらでも正確なスペクトルを作ることが出来る。しかしながら，ここでは高次の励起状態を無視して，乱雑近似で Bethe-Salpeter 方程式を解く。この論文では，二体のポテンシャルとして，一定の強さの近距離力をとる。与えられたポテンシャルに対して，ϕ の基底状態の期待値を自己無撞着的に決めることが出来るが，ϕ の基底状態の期待として Gaussian を仮定する。最後に，系を一次元に限定して議論を進める。

---

*) Kitamura Toyoyuki

§2では，ハミルトニアンのφを基底状態と励起状態に置きかえて書き直す。§3では，Bethe-Salpeter方程式を乱雑近似で検討する。§4では，与えられたポテンシャルと基底状態に対して，自己無撞着のBethe-Salpeter方程式を得る。長波長の間隙のないフォノンスペクトルが§5で与えられる。§6で若干の議論をする。

2. ハミルトニアン

我々は次のハミルトニアンから出発する：

$$H=\int dx\,\varphi^{+}(x)\,\varepsilon(\partial)\,\varphi(x)+\int dx\,dy\,\varphi^{+}(x)\,\varphi^{+}(y)\,V(x-y)\,\varphi(y)\,\varphi(x), \tag{2・1}$$

ここで，φは分子の場の演算子であり，$\varepsilon(\partial)$は微分演算子，$V(x-y)$は分子間ポテンシャルである。φの基底状態の期待値の存在の仮定から，

$$\varphi(x)=u(x)\,\mathrm{e}^{if(x)}+\phi(x), \tag{2・2}$$

ここで，基礎格子ベクトルaに対して，

$$u(x+a)\,\mathrm{e}^{if(x+a)}=u(x)\,\mathrm{e}^{if(x)} \tag{2・3}$$

φのdynamial mapの議論から

$$\phi(x)=\int_{\Omega_{\mathrm{B}}}dk\,\varphi_{0}(x)\,\mathrm{e}^{ikx}\,a_{k}, \tag{2・4}$$

と置く。ここで，Ω_{B}は第一Brillouin域で，φ_0は，

$$\varphi_{0}(x)=\eta^{-1}\nabla(u(x)\,\mathrm{e}^{if(x)}), \tag{2・5}$$

ここで，η^{-1}は定数である。

(2・2)式を(2・1)式に代入すると

$$\begin{aligned}H=&\int dk\,[\omega_{k}\,a_{k}^{+}a_{k}+\bar{U}_{k}(a_{-k}\,a_{k}+a_{k}^{+}a_{-k}^{+})-\delta\varepsilon_{k}\,a_{k}^{+}a_{k}-D_{k}(a_{-k}\,a_{k}+a_{k}^{+}a_{-k}^{+})+\varphi_{0}'(a_{0}+a_{0}^{+})]\\&+\int dk_{1}\,dk_{2}\,g(k_{1}-k_{2})(a_{k_1}^{+}\,a_{k_2}\,a_{k_1-k_2}+a_{k_2-k_1}^{+}\,a_{k_2}^{+}\,a_{k_1})\\&+\int dk_{1}\,dk_{2}\,dk_{3}\,f(k_{1}-k_{2})\,a_{k_1}^{+}\,a_{k_3}^{+}\,a_{k_1-k_2+k_3}\,a_{k_2},\end{aligned} \tag{2・6}$$

ここで，

$$g(k)=2\int dx\,dy\,u(x)\,e^{-if(x)}\varphi_0^*(y)\,\varphi_0(y)\,\varphi_0(x)\,e^{ik(x-y)}V(x-y)\,, \tag{2・7}$$

$$f(k)=\int dx\,dy\,\varphi_0^*(x)\,\varphi_0^*(y)\,\varphi_0(y)\,\varphi_0(x)\,e^{ik(x-y)}\,V(x-y), \tag{2・8}$$

$$\omega_k=\omega_k^0+2V_k+\delta\varepsilon_k, \tag{2・9}$$

$$\overline{U}_k=U_k+D_k, \tag{2・10}$$

$$\omega_k^0=\int dx\,\varphi_0^*(x)\,e^{-ikx}(\,\varepsilon(\partial)+2\int u^2(y)\,V(x-y)\,)\,\varphi_0(x)\,e^{ikx}, \tag{2・11}$$

$$V_k=\int dx\,dy\,u(x)\,e^{-if(x)}u(y)\,e^{if(y)}\varphi_0^*(y)\,\varphi_0(x)\,e^{-ik(x-y)}V(x-y), \tag{2・12}$$

$$U_k=\int dx\,dy\,u(x)\,e^{-if(x)}u(y)\,e^{if(y)}\varphi_0(y)\,\varphi_0(x)\,e^{ik(x-y)}V(x-y), \tag{2・13}$$

$$\omega_0'=\int dx\,u(x)\,e^{-if(x)}(\,\varepsilon(\partial)+2\int u^2(y)\,V(x-y)\,)\,\varphi_0(x), \tag{2・14}$$

ここで，$g(k)$ と $\overline{U}_k$ が実数になるように，η^{-1} と a_k の位相をとった。D_k と $\delta\varepsilon_k$ は後で自己無撞着的に決められる。

3. Bethe-Salpeter 方程式

われわれは間隙のないフォノン・モードの存在やこれらのモードによるdynamical map に興味があるので，これらのフォノン・モードを考察する。さて，次のような Green 関数に対するBethe-Salpeter 方程式を導こう：

$$G_{k,\,k-p}(t_1,\,t_2)\equiv\langle 0\,|\,TA_k(t_1)\,A_{k-p}^+(t_2)\,|\,B_p\rangle, \tag{3・1}$$

ここで，$|\,0\rangle$ と $|\,B_p\rangle$ はそれぞれ基底状態とフォノンの励起状態である。A_k は次のようである：

$$A_k(t)=\begin{pmatrix} a_k(t) \\ a_{-k}^+(t)\end{pmatrix} \tag{3・2}$$

交換関係を使って

$$(\,i\frac{\partial}{\partial t}\tau_3-\hat{E}_k\,)\,A_k(t)=S_k-\delta S_k A_k, \tag{3・3}$$

ここで，τ_3 は Pauli行列，$\hat{E}_k$，S_k と δS_k は次のように定義される：

$$\hat{E}_k \equiv \begin{pmatrix} \omega_k & \varDelta_k \\ \varDelta_k & \omega_k \end{pmatrix} \tag{3・4}$$

$$S_k \equiv \int dk' \begin{pmatrix} g_{k'}\, a_{-k'+k} a_{k'} + (g_k + g_{k'-k})\, a^+_{k'-k}\, a_{k'} \\ g_{k'}\, a^+_{-k'}\, a^+_{k'-k} + (g_k + g_{k'-k})\, a^+_{-k'}\, a_{-k'+p} \end{pmatrix}$$

$$+\int dk_1\, dk_2 \begin{pmatrix} (f_{k_1-k_2} + f_{k-k_2})\, a^+_{k_1} a_{k_2}\, a_{k+k_1-k_2} \\ (f_{k_1-k_2} + f_{k+k_2})\, a^+_{k_1-k_2-k}\, a^+_{k_2}\, a_{k_1} \end{pmatrix} \tag{3・5}$$

$$\delta S_k \equiv \begin{pmatrix} \delta\varepsilon_k & 2D_k \\ 2D_k & \delta\varepsilon_k \end{pmatrix} \tag{3・6}$$

最初，Green 関数 $G_{k,\,k}(t_1,\ t_2)$ を検討してみる。$G_{k,\,k}(t_1;\ t_2)$ は次のようである：

$$G_{k,\,k}(t_1,\ t_2) = <0\,|\,T A_k(t_1)\, A^+_k(t_2)\,|\,0> \tag{3・7}$$

(3.3) 式から

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t_1}\tau_3 - \hat{E}_k\right) G_{k,\,k}(t_1,\ t_2)\left(-i\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t_2}\tau_3 - \hat{E}_k\right) = <0\,|\,i\delta(t_1 - t_2)\left(-i\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t}\tau_3 - \hat{E}_k\right)$$

$$-i\delta(t_1 - t_2)\,[S_k - \delta S_k A_k,\ A^+_k]\,\tau_3 + T\,[S_k - \delta S_k A_k,\ S^+_k - A^+_k\,\delta S^+_k]\,|\,0>, \tag{3・8}$$

である。ここで [⋯] は交換関係を，$\dfrac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t}$ は左側に作用することを示している。(3.5) 式から，

$$<0\,|\,[S_k - \delta S_k A_k,\ A^+_k]\,|\,0>$$

$$= 2\int dk' (f_0 + f_{k-k'}) \begin{pmatrix} G^{11}_{k',\,k'}(t_1,\ t_2) & 0 \\ 0 & G^{22}_{k',\,k'}(t_1,\ t_2) \end{pmatrix}$$

$$+ 2\int dk' f_{k-k'} \begin{pmatrix} 0 & G^{12}_{k',\,k'}(t_1,\ t_2) \\ G^{21}_{k',\,k'}(t_1,\ t_2) & 0 \end{pmatrix} \delta(t_1 - t_2) - \delta S_k, \tag{3・9}$$

ここで，$<0\,|A_p|\,0> = 0$ とした。(3・8) 式を解くため，乱雑近似をする。乱雑近似では (3・8) 式の最後の項は全然寄与しない。

さて，次のGreen関数を導入しよう：

$$G_k^0(t_1-t_2)=<0\,|\,T\tilde{A}_k(t_1)\,\tilde{A}_k^+(t_2)|\,0>, \tag{3・10}$$

(3・10)式は次の式を満足しているとする：

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t_1}\tau_3-\hat{E}_k\right)G_k^0(t_1-t_2)=i\delta(t_1-t_2), \tag{3・11}$$

$G_k^0(t_1-t_2)$ のフーリエ解析は

$$G_k^0(t_1-t_2)\equiv i\int\frac{dk_0}{2\pi}G^0(k)\,e^{ik_0(t_1-t_2)}, \tag{3・12}$$

と定義され，ここで

$$G^0(k)=(k_0\tau_3-\hat{E}_k)^{-1}=-\frac{1}{k_0^2-E_k^2}\begin{pmatrix}-k_0-\omega_k & \Delta_k\\ \Delta_k & k_0-\omega_k\end{pmatrix} \tag{3・13}$$

$$E_k=\sqrt{\omega_k^2-\Delta_k^2}, \tag{3・14}$$

である。

(3・10)式と(3・11)式から

$$G_{k,k}(t_1,t_2)=G_k^0(t_1-t_2)-i\int dt\,G_k^0(t_1-t)<0\,|\,[S_k-\delta S_kA_k,A_k^+(t)]\,|\,0>\tau_3G_k^0(t-t_2), \tag{3・15}$$

である。E_k を自己無撞着的に決めるため，

$$G_{k,k}(t_1-t_2)=G_k^0(t_1-t_2), \tag{3・16}$$

$$<0\,|\,[S_k-\delta S_kA_k,A_k^+]\,|\,0>=0, \tag{3・17}$$

とする。(3・17)式は次の自己無撞着な方程式を与える。

$$\delta\varepsilon_k=2\int dk'(f_0+f_{k-k'})\,G_{k'11}^0(0), \tag{3・18}$$

$$D_k=\int dk'f_{k-k'}\,G_{k'12}^0(0), \tag{3・19}$$

ここで

$$G_k^0(0)=-\frac{1}{2E_k}\begin{pmatrix}-\omega_k & \Delta_k \\ \Delta_k & -\omega_k\end{pmatrix} \tag{3・20}$$

次にGreen 関数 $G_{k,\,k-p}(t_1,t_2)$ を計算する。

乱雑近似では

$$G_{k,\,k-p}(t_1,t_2)=-i\int\frac{dt}{2\pi}G_k^0(t_1-t)<0\,|\,[S_k(t),A_{k-p}^+(t)]\,|\,B_p>\tau_3\,G_{k-p}^0(t-t_2), \tag{3・21}$$

もし，

$$G_{k,\,k-p}(t,t)\equiv G(k,\,k-p)\,\mathrm{e}^{-ip_0t} \tag{3・22}$$

とすれば

$$G(k,\,k-p)=i\int\frac{dk_0}{2\pi}G^0(k)\,\Gamma(k,\,k-p)\,G^0(k-p), \tag{3・23}$$

ここで，

$$\Gamma(k,\,k-p)=\begin{pmatrix}(g_p+g_{k-p})H^1(p)+(g_k+g_p)H^2(p) & (g_k+g_{k-p})H^1(p) \\ (g_k+g_{k-p})H^1(p) & (g_p+g_{k-p})H^2(p)+(g_k+g_p)H^1(p)\end{pmatrix}$$
$$+2\int dk'(f_p+f_{k-k'})\begin{pmatrix}G^{11}(k',\,k'-p) & 0 \\ 0 & G^{22}(k',\,k'-p)\end{pmatrix}$$
$$+2\int dk' f_{k-k'}\begin{pmatrix}0 & G^{12}(k',\,k'-p) \\ G^{21}(k',\,k'-p) & 0\end{pmatrix}, \tag{3・24}$$

ここで，新しい Green 関数 $H(p)$ は

$$H_p(t)=<0\,|\,A_p(t)\,|\,B_p>=H(p)\,\mathrm{e}^{-ip_0t}, \tag{3・25}$$

$H_p(t)$ の運動方程式は

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}\tau_3-\hat{E}_p\right)H_p(t)=<0\,|\,S_p+\omega_0'\delta_{p,\,0}\,|\,B_p>, \tag{3・26}$$

乱雑近似では，(3・5) 式の第二項は (3・26) 式に寄与しない。そこで

$$H(p)=G^0(p)<0|S_p|B_p>_{p_0} \tag{3・27}$$

である。ここで

$$<0|S_p|B_p>_{p_0}=\int dk' \begin{pmatrix} g_{k'}G^{12}(k', k'-p)+(g_p+g_{k'-p})G^{11}(k', k'-p) \\ g_{k'}G^{21}(k', k'-p)+(g_p+g_{k'-p})G^{22}(k', k'-p) \end{pmatrix}, \tag{3・28}$$

ω_0'は$<0|S_p+\omega_0'\delta_{p,0}|0>=0$から自己無撞着にきめられ

$$\omega_0'=\int dk'\{g_{k'}G^0_{k'12}(0)+(g_0+g_{k'})G^0_{k'11}(0)\} \tag{3・29}$$

結局，自己無撞着な方程式（3・18），（3・19）と（3・29）及び，結合したBethe-Salpeter方程式（3・23）と（3・27）を得た。

4. 近似の手続

Bethe-Salpeter方程式（3・23）と（3・27）は任意のポテンシャル$V(x-y)$に対して正確にとくことが出来ない。そこで$V(x-y)$は近距離力で，近接分子とのみ一定の強さV_0/Nで働いていると仮定する。ここでNは系の粒子数である。さらに，与えられたポテンシャルに対して自己無撞着的に$u(x)e^{if(x)}$の型を決めることが出来ないので，次の型を仮定する：

$$u(x)=\sum\left(\frac{1}{\pi d}\right)^{1/4}e^{-\frac{(x-na)^2}{2d^2}} \tag{4・1}$$

$$e^{if(x)}=e^{iKx} \tag{4・2}$$

ここで分子の分布確率として半値幅dのガウスの分布関数を仮定した。Kは逆格子ベクトルである。位相因子$e^{if(x)}$は格子ベクトルの周期関数であればどんな関数でもよい。従って，因子e^{iKx}は関数$e^{if(x)}$のフーリエ級数の一成分であると考えることが出来る。因子e^{iKx}は周期的格子の形成に重要な役割をなす。

$V(x-y)$や$u(x)e^{if(x)}$に対する仮定は式（2・7）と（2・8）の$g(k)$や$f(k)$が$G(k, k-p)$にくらべて，kのゆっくり変化する関数であることを示している。そこで$g(k)$や$f(k)$はそれぞれ定数のgやfに置きかえる。同様にして，$V_k=V$，$U_k=U$と置く。（4・1）式と（4・2）式から

$$f=V_0\eta^{-2}\left(\frac{1}{2d^2}+K^2\right)^2, \tag{4・3}$$

$$g=2V_0\eta^{-3}K(\frac{1}{2d^2}+K^2), \tag{4・4}$$

$$V=V_0\eta^{-2}K^2, \tag{4・5}$$

$$U=V_0\eta^{-2}K^2, \tag{4・6}$$

$$\omega_0'=\eta^{-1}[\frac{3K}{2d^2}+K^3+(-\mu+2V_0)K], \tag{4・7}$$

$$\omega_0(k)=\eta^{-2}[\frac{3}{4d^4}+\frac{3K^2+3kK+\frac{k^2}{2}}{d^2}+K(K+k)^2+(-\mu+2V_0)(\frac{1}{2d^2}+K^2)] \tag{4・8}$$

ここで，U が実数になるように因子 η^{-1} をとった。

もし

$$G(p)\equiv\int dk'G(k',k'-p), \tag{4・9}$$

とすれば

$$G(p)=i\int\frac{dk\,dk_0}{2\pi}G^0(k)\,\Gamma(p)\,G^0(k-p), \tag{4・10}$$

$$H(p)=G^0(p)\;g\begin{pmatrix}G_{12}(p)+2G_{11}(p)\\ G_{21}(p)+2G_{22}(p)\end{pmatrix}, \tag{4・11}$$

である。ここで

$$\Gamma(p)=\begin{pmatrix}g(H^1(p)+H^2(p))+2fG_{11}(p) & gH^1(p)+fG_{12}(p)\\ gH^2(p)+fG_{21}(p) & g(H^1(p)+H^2(p))+2fG_{22}(p)\end{pmatrix}, \tag{4・12}$$

もし，次のような記号を使えば

$$G^0(p)=\begin{pmatrix}G^0_{(1)}(p) & G^0_{(3)}(p)\\ G^0_{(3)} & G^0_{(2)}(p)\end{pmatrix}, \tag{4・13}$$

$$Qij(p)=i\int\frac{dk\,dk_0}{2\pi}G^0_{(i)}(k)\,G^0_{(j)}(k-p), \tag{4・14}$$

$$G(p)=\begin{pmatrix} G_{(3)}(p) & G_{(1)}(p) \\ G_{(2)}(p) & G_{(3)}(p) \end{pmatrix} \qquad (4\cdot15)$$

(4・10) 式と (4・11) 式は

$$A(p)\ G_{(1)}(p)+B(p)\ G_{(2)}(p)+C(p)\ G_{(3)}(p)=0, \qquad (4\cdot16)$$

$$D(p)\ G_{(1)}(p)+E(p)\ G_{(2)}(p)+F(p)\ G_{(3)}(p)=0, \qquad (4\cdot17)$$

$$H(p)\ G_{(1)}(p)+I(p)\ G_{(2)}(p)+J(p)\ G_{(3)}(p)=0, \qquad (4\cdot18)$$

となる。ここで

$$A(p)=2Q_{13}(G^0_{(1)}+G^0_{(3)})+Q_{12}(G^0_{(1)}+\gamma)+Q_{33}G^0_{(3)}-\frac{1}{2g^2}, \qquad (4\cdot19)$$

$$B(p)=2Q_{13}(G^0_{(2)}+G^0_{(3)})+Q_{12}G^0_{(3)}+Q_{33}(G^0_{(2)}+\gamma), \qquad (4\cdot20)$$

$$C(p)=4Q_{13}(G^0_{(1)}+G^0_{(2)}+2G^0_{(3)}+\gamma)+2Q_{12}(G^0_{(1)}+G^0_{(3)})+2Q_{33}(G^0_{(2)}+G^0_{(3)}), \qquad (4\cdot21)$$

$$D(p)=2Q_{23}(G^0_{(1)}+G^0_{(3)})+Q_{33}(G^0_{(1)}+\gamma)+Q_{21}G^0_{(3)}, \qquad (4\cdot22)$$

$$E(p)=2Q_{23}(G^0_{(2)}+G^0_{(3)})+Q_{33}G^0_{(3)}+Q_{21}(G^0_{(2)}+\gamma)-\frac{1}{2g^2}, \qquad (4\cdot23)$$

$$F(p)=4Q_{23}(G^0_{(1)}+G^0_{(2)}+2G^0_{(3)})+2Q_{33}(G^0_{(1)}+G^0_{(3)})+2Q_{21}(G^0_{(2)}+G^0_{(3)}), \qquad (4\cdot24)$$

$$H(p)=(Q_{11}+Q_{33})(G^0_{(1)}+G^0_{(3)})+Q_{13}(G^0_{(1)}+\gamma)+Q_{23}G^0_{(3)}, \qquad (4\cdot25)$$

$$I(p)=(Q_{11}+Q_{33})(G^0_{(2)}+G^0_{(3)})+Q_{13}G^0_{(3)}+Q_{23}(G^0_{(2)}+\gamma), \qquad (4\cdot26)$$

$$J(p)=2(Q_{11}+Q_{33})(G^0_{(1)}+G^0_{(2)}+2G^0_{(3)})+2Q_{13}(G^0_{(1)}+G^0_{(3)})+2Q_{23}(G^0_{(2)}+G^0_{(3)})-\frac{1}{g^2}, \qquad (4\cdot27)$$

ここで

$$\gamma=\frac{f}{g^2}, \qquad (4\cdot28)$$

(3・18), (3・19), (3・29) 式は次のようである：

$$\delta\varepsilon=2f\int dk\frac{\omega_k}{E_k} \qquad (4\cdot29)$$

$$D=-\frac{f}{2}\int dk\,\frac{\Delta}{E_k} \tag{4・30}$$

$$\omega_0'=\frac{g}{f}(D+2\,\delta\varepsilon) \tag{4・31}$$

5. フォノン・スペクトル

フォノンスペクトルを決めるため

$$\Lambda(p)=\begin{vmatrix}A & B & C\\ D & E & F\\ H & I & J\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}A-B+E-D & B-E & C-F\\ D-E & E & F\\ H-I & I & J\end{vmatrix}=0, \tag{5・1}$$

とする。ここで，Q_{ij}を次のように書き直す。

$$Q_{12}(p)=Q^{+}(p)+p_0\,Q^{-}(p),\qquad Q_{21}(p)=Q^{+}(p)-p_0\,Q^{-}, \tag{5・2}$$

$$Q_{13}(p)=\Delta(L-p_0R),\qquad Q_{23}(p)=\Delta(L+p_0R), \tag{5・3}$$

$$Q_{33}=2\,\Delta^2R, \tag{5・4}$$

$$Q^{+}=\frac{1}{2}\int dk(EE'+\omega\omega')\,f,\qquad Q^{-}=\frac{1}{2}\int dk(\omega E'+\omega'E)f, \tag{5・5}$$

$$R=\frac{1}{4}\int dk(E+E')f,\qquad L=-\frac{1}{4}\int dk(\omega+\omega')(E+E')\,f, \tag{5・6}$$

$$Q_{11}=-\frac{1}{2}\int dk(EE'-\omega\omega')(E+E')\,f, \tag{5・7}$$

ここで，$\omega=\omega_k$，$E=E_k$，$\omega'=\omega_{k-p}$，$E'=E_{k-p}$であり，

$$f=\frac{1}{EE'}\cdot\frac{1}{p_0^2-(E+E')^2}, \tag{5・8}$$

である。これらの結果，間隙方程式（4・30）は

$$-\frac{D}{f\Delta}+Q^{+}-2\,\Delta^2R=(p_0^2-\bar{\omega}_p^2)\,R, \tag{5・9}$$

となる。ここで

$$\bar{\omega}_p^2R=\frac{1}{4}\int dk(E+E')(\omega-\omega')^2f, \tag{5・10}$$

である。興味がある長波長領域においては，$\bar{\omega}_p^2$はp^2に比例している。

(4・19)〜(4・23) から

$$A-B+E-D=\frac{2}{p_0^2-E^2}\{(Q^+-4\Delta R+(Q^+-2\Delta^2 R)\gamma-\frac{1}{2g^2})p_0^2+\tilde{\Omega}\}, \tag{5・11}$$

ここで，

$$\tilde{\Omega}=(\omega+\Delta-E^2\gamma)(Q^+-2\Delta^2 R+\frac{E^2\gamma}{2(\omega+\Delta-E^2\gamma)f}), \tag{5・12}$$

である。(4・3)〜(4・8) と (4・31) から，(5・12) 式の$E^2\gamma/2(\omega+\Delta-E^2\gamma)f$は$-(4D+\eta^{-2}K^2/d^2)/f(4\Delta+2\eta^{-2}\frac{K^2}{d^2})$ である。(4・7) と (4・31) から，Dは$\eta^{-2}(\frac{1}{2d^2}+K^2)(\frac{3}{2d^2}+K^2-\mu+2V_0)$のオーダーである。こうして，$K\ll\frac{1}{d}$又は$K\gg\frac{1}{d}$の条件のもとに

$$\frac{E^2\gamma}{2(\omega+\Delta-E^2\gamma)f}\cong-\frac{\Delta}{fD}, \tag{5・13}$$

$$\tilde{\Omega}=\beta(p_0^2-\bar{\omega}_p^2), \tag{5・14}$$

$$A-B+E-D=\frac{2}{p_0^2-E^2}(\alpha p_0^2-\beta\bar{\omega}_p^2), \tag{5・15}$$

である。ここで

$$\alpha=Q^--4\Delta R+(Q^+-2\Delta^2 R)\gamma-\frac{1}{2g^2}+\beta, \tag{5・16}$$

$$\beta=2(\frac{1}{4V_0 d^2}+1)\Delta, \tag{5・17}$$

である。

長波長領域に興味があるので，p^2のオーダーまでの精度で (5・1) は

$$\Lambda(p)=-\frac{2S}{E^6}[p_0^2-\frac{\beta(EJ-IF)}{S}\bar{\omega}_p^2], \tag{5・18}$$

である。ここで

$$S=2\alpha(EJ-IF)+2\zeta\eta F-\eta\xi J+2\delta\xi I-4\zeta\delta E, \tag{5・19}$$

$$\delta=(Q^{-}-4\Delta R)(\omega-\Delta)+Q^{+}-2\Delta^{2}R+2E^{2}\Delta R\gamma, \tag{5・20}$$

$$\zeta=Q_{11}+2\Delta^{2}R+\Delta L-\Delta R(\omega+\Delta)+E^{2}\Delta R\gamma, \tag{5・21}$$

$$\eta=(Q^{-}-4\Delta R)(\omega-\Delta)+Q^{+}-2\Delta^{2}R-E^{2}Q^{-}\gamma, \tag{5・22}$$

$$\xi=Q^{+}+2\Delta^{2}R+4\Delta L+Q^{-}(\omega+\Delta)-E^{2}Q^{-}\gamma, \tag{5・23}$$

である。(5・18)～(5・23)式において，p_0^2, $\bar{\omega}_p^2$の項を除いてすべての項で$p=0$, $p_0=0$とおいた。結局，間隙のないフォノン・スペクトルΩ_pとして，

$$\Omega_p^2=\frac{4\Delta R(EJ-IF)}{S}\,\bar{\omega}_p^2, \tag{5・24}$$

を得た。

6. 議　論

Ward-高橋関係式を使って，De Luca等のものより，分子の第一励起状態としてより正確な型をとった。乱雑近似でBethe-Salpeter方程式を解くために，次の仮定を置いた：二体のポテンシャルは一定の強さの近距離力である。ϕの基底状態の期待値として(4・1)と(4・2)式の型をとった。

Ward-高橋関係式において，二体ポテンシシャルの具体的な型に対して間隙のないフォノンの存在は，その型に対応する格子構造を要請する。一定の強さで最近接分子のみに働くわれわれのポテンシャルにおける間隙のないフォノンの存在は$K\ll\frac{1}{d}$又は$K\gg\frac{1}{d}$を要請している。前者は分子の存在確率の半値幅より分子間隔がずっと大きいことを，即ち，分子がよく局在していることを示している。後者は逆で，ϕの基底状態の期待値が，即ち，$u(x)$がむしろ平らであることを示している。この状態は超流動に対応しており，事実，ポテンシャルの型としてデルタ関数をとると，間隙のないフォノンの存在は$K\gg\frac{1}{d}$の条件を要請する。$K\gg\frac{1}{d}$の極限では，デルタ関数型のポテンシャルに対するフォノン・スペクトルはわれわれのポテンシャルのものと一致する。超流動の系は位相変換に対して不変である。従って，位相因子e^{iKx}において，Kxを位相とみなし，$u=$一定，$\eta^{-1}=(iK)^{-1}$ととれば，われわれの系は，Coniglio と Marinaro[4]によって計算された超流動の系に移行する。

位相因子e^{iKx}の存在は結晶格子の構築に本質的役割をなしている。事実，$K=0$とすると(4・5)～(4・7)式の格子にとって重要な量，g, U, Vは零になる。

De Luca等の取扱いでは，結晶構造の議論は出来ないことを注意しておく。

最後に，論文作成中，いつも有益な意見と議論をいただいた和達三樹先生に感謝致します。また，有益な意見と議論をいただいた高橋康先生に感謝致します。

参　考　文　献

1) M. Wadati, H. Matsumoto, Y. Takahashi and H. Umezawa, Phys. Lett. **62A** (1977) 255, 258.
M. Wadati, H. Matsumoto, Y. Takahashi and H. Umezawa, Fortschritte der Physik **26** (1978) 357.
M. Wadati, H. Matsumoto and H. Umezawa, Phys. Rev. **B18** (1978) 4077.
M. Wadati, Phys. Reports **50** (1979) 87.
2) 準備中
3) A. De Luca, L.M. Ricciordi and H. Umezawa, Physica **40** (1968) 61.
4) A. Coniglio and M. Marinaro, Nuovo Cimento **48B** (1967) 249, 262.